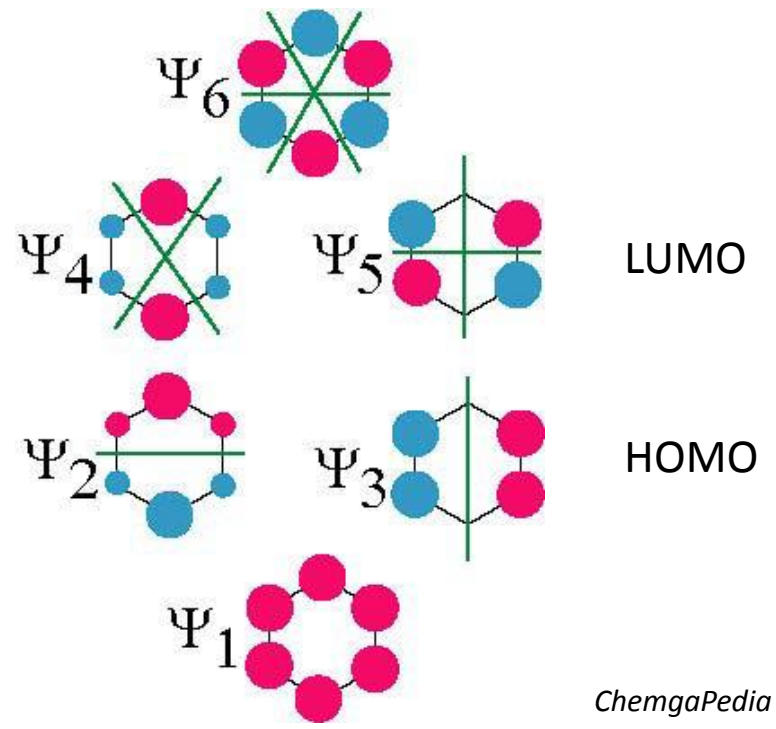
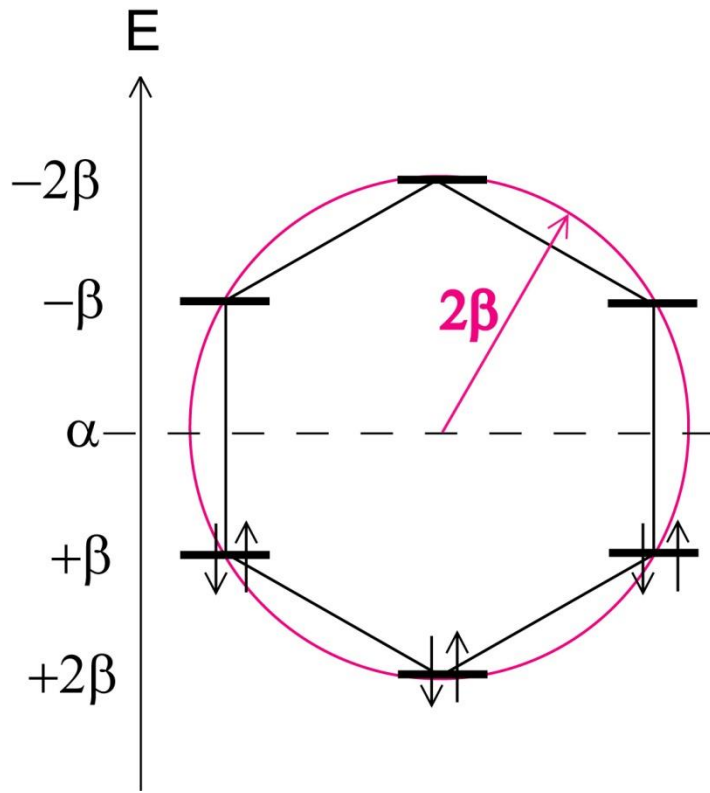
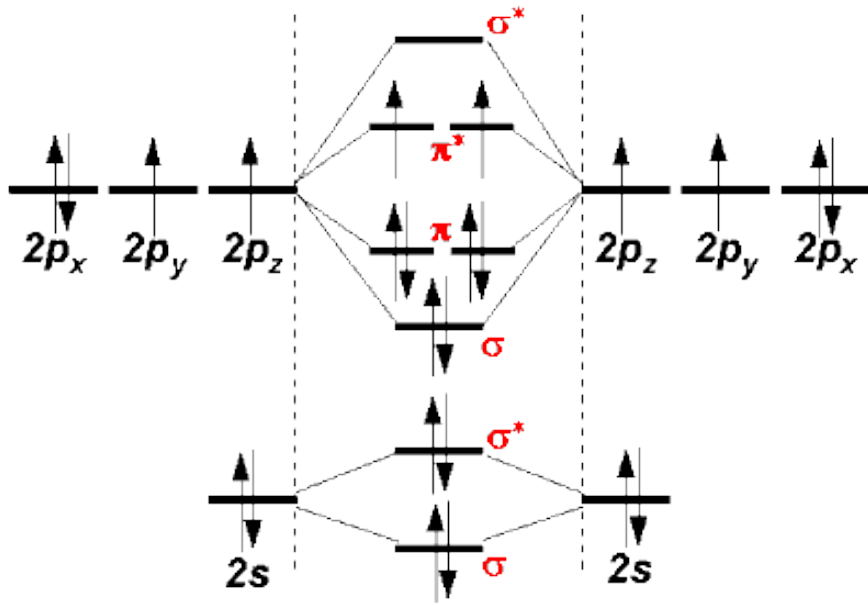


Molekülorbitale von Benzol

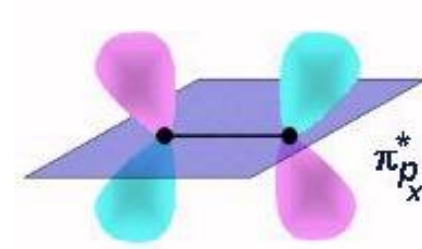
$$\begin{vmatrix}
 \alpha - E & \beta & 0 & 0 & 0 & \beta \\
 \beta & \alpha - E & \beta & 0 & 0 & 0 \\
 0 & \beta & \alpha - E & \beta & 0 & 0 \\
 0 & 0 & \beta & \alpha - E & \beta & 0 \\
 0 & 0 & 0 & \beta & \alpha - E & \beta \\
 \beta & 0 & 0 & 0 & \beta & \alpha - E
 \end{vmatrix} = 0$$



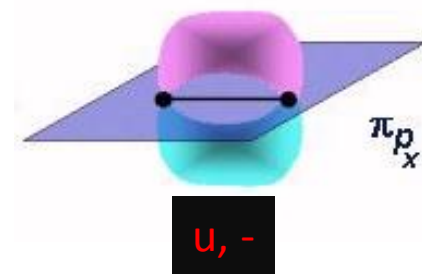
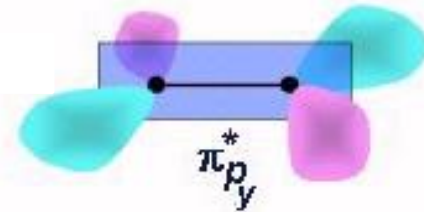
Termsymbole



$\lambda = +1$



$\lambda = -1$



$$3 \sum_{\sigma} -$$

(erster angeregter Zustand mit gepaarten Elektronen in π_{p_x} ?)

Tabelle 13.3. Elektronenkonfiguration homonuklearer zweiatomiger Moleküle (die eingeklammerten Moleküle sind nicht stabil)

Molekül	Konfiguration								Grundzustand
	$\sigma_g 1s$	$\sigma_u^* 1s$	$\sigma_g 2s$	$\sigma_u^* 2s$	$\pi_u 2p$	$\sigma_g 2p$	$\pi_g^* 2p$	$\sigma_u^* 2p$	
H_2^+	\uparrow								$2 \Sigma_g$
H_2	$\uparrow\downarrow$								$1 \Sigma_g$
He_2^+	$\uparrow\downarrow$	\uparrow							$2 \Sigma_u$
(He_2)	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$							$1 \Sigma_g$
Li_2	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$						$1 \Sigma_g$
(Be_2)	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$					$1 \Sigma_g$
B_2	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\uparrow$				$3 \Sigma_g$
C_2	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$				$1 \Sigma_g$
N_2	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$			$1 \Sigma_g$
O_2	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\uparrow$		$3 \Sigma_g$
F_2	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$		$1 \Sigma_g$
(Ne_2)	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$1 \Sigma_g$

Elektronische Übergänge in H₂

Konfigurationen

1sσ _g	2sσ _g	2pσ _g	2pπ _u	
↑↓				1Σ _g ⁺
↑	↓			1Σ _g ⁺
↑	↑			3Σ _g ⁺
↑		↓		1Σ _u ⁺
↑			↓	1Π _u

(1sσ_u^{*} 2sσ_u^{*} instabil)

Termschema

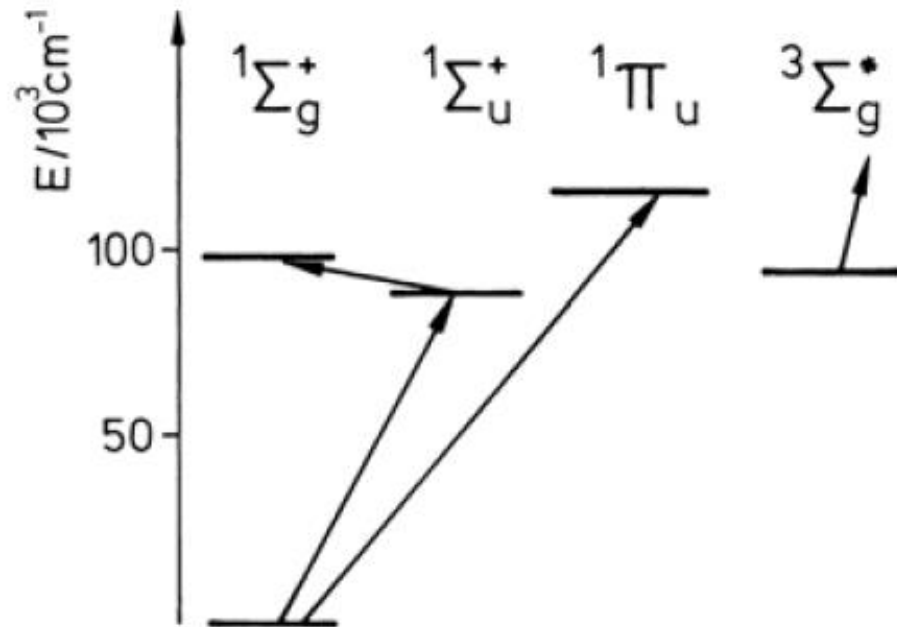


Abb. 13.10. Grundzustand und tiefste elektronische Anregungszustände des H₂-Moleküls. Elektronenkonfigurationen und vereinfachtes Termschema

Elektronische Übergänge in H₂

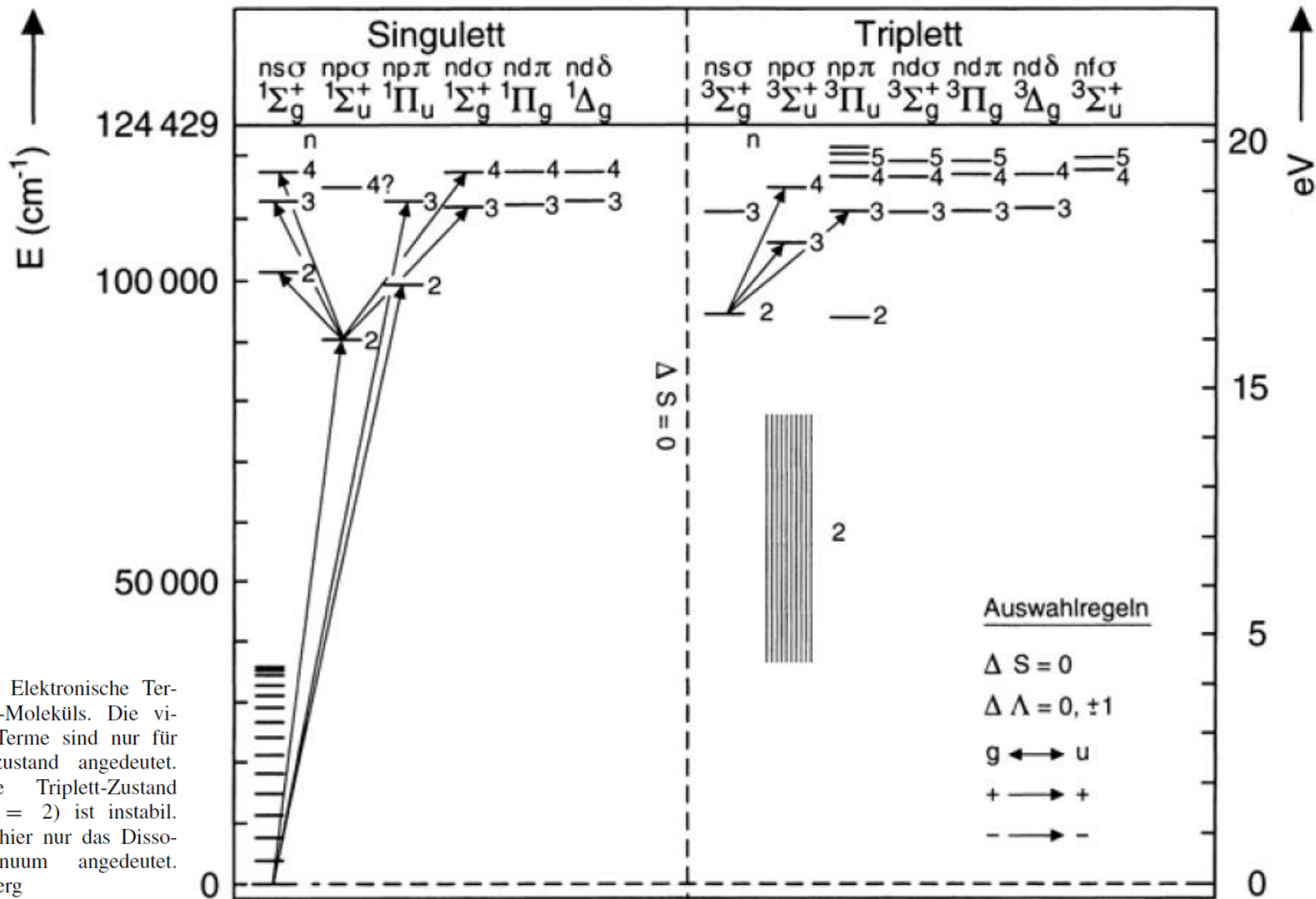
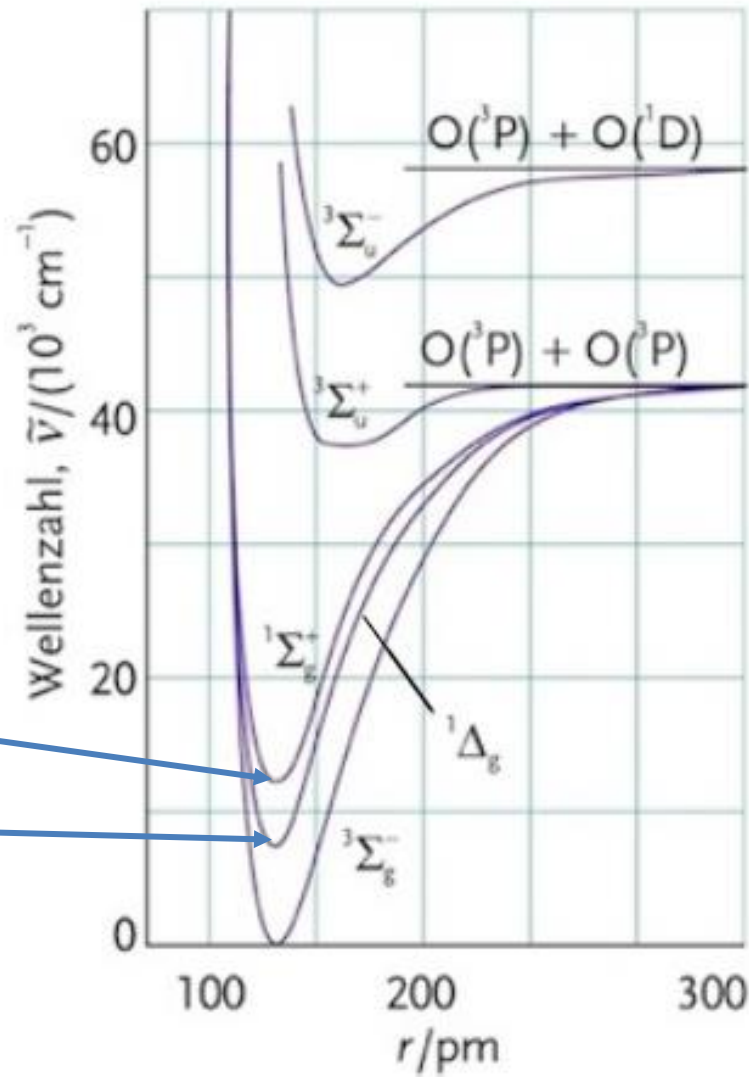


Abb. 13.11. Elektronische Terme des H₂-Moleküls. Die vibronischen Terme sind nur für den Grundzustand angedeutet. Der tiefste Triplet-Zustand $np_\sigma 3\Sigma_u^+(n = 2)$ ist instabil. Deshalb ist hier nur das Dissoziationskontinuum angedeutet. Nach Herzberg

Elektronische Übergänge in O₂



$\sim 10^{-9} \text{ s}$

$\sim 10^{-4} \text{ s}$

Elektronische Übergänge in O₂

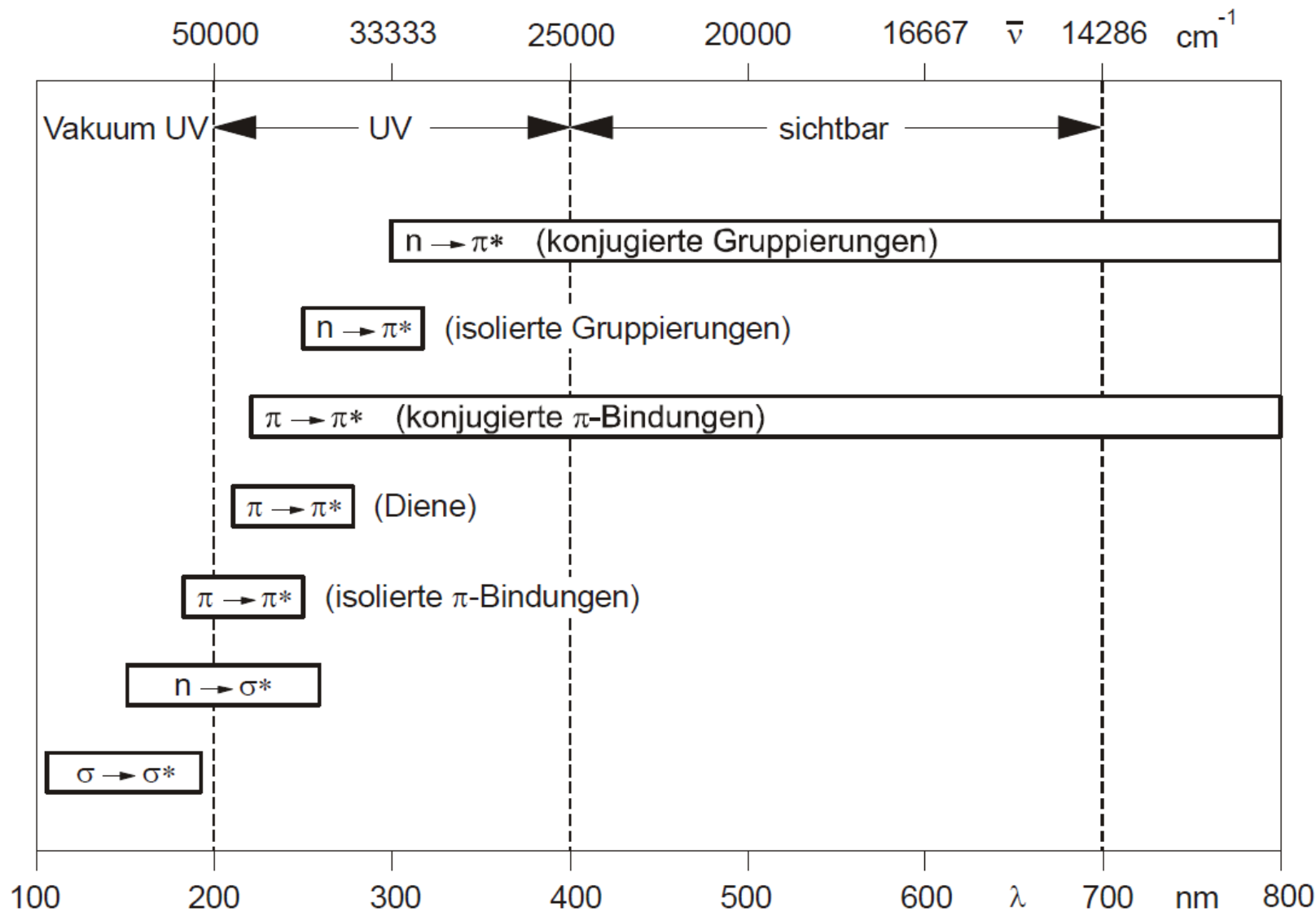


Universität Siegen

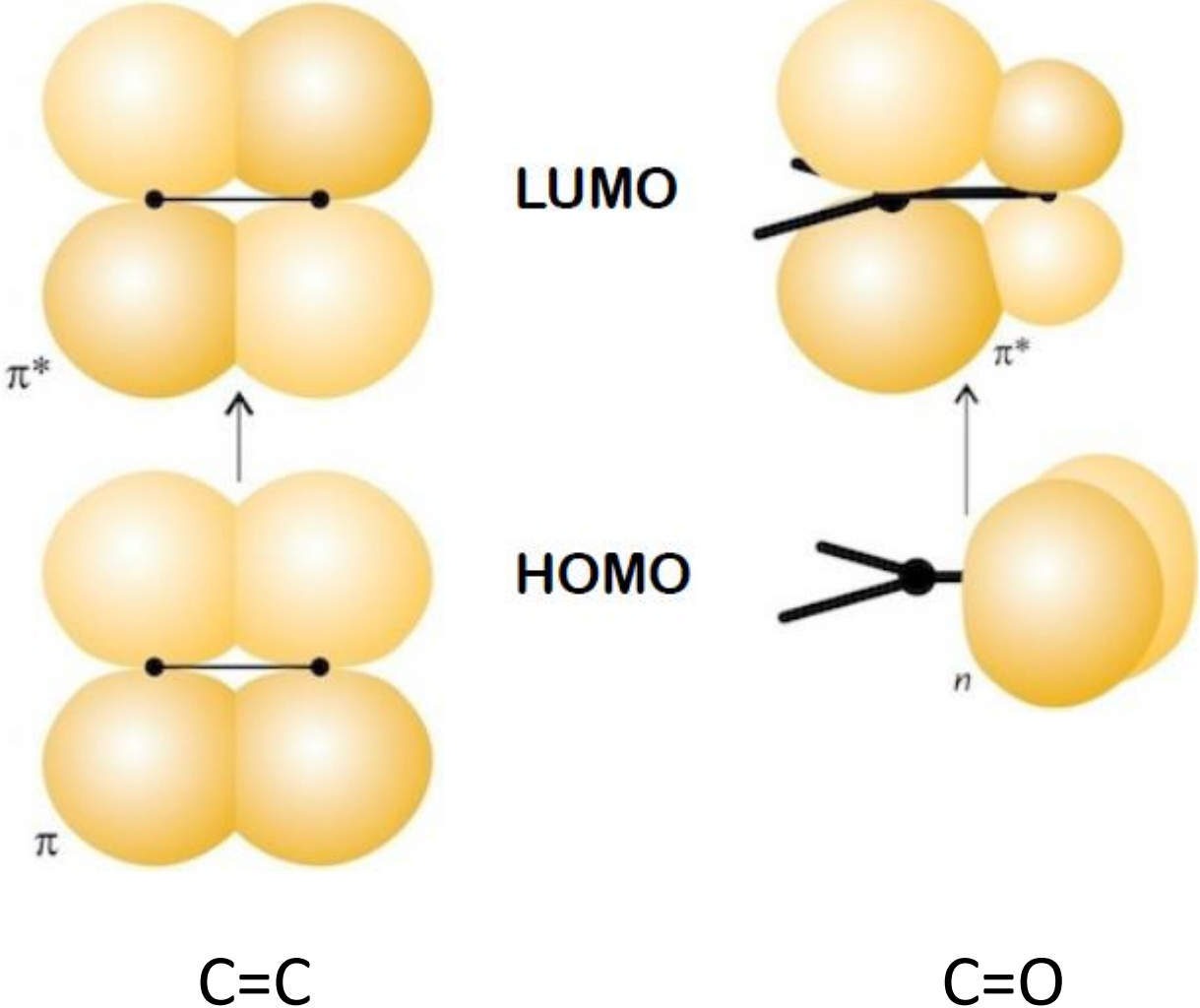


$(\lambda_{em} = 633 \text{ nm})$

Lechtken, Chemie in unserer Zeit, 1974



n- π und π - π^*



cis-trans-Isomerisierung von Retinal

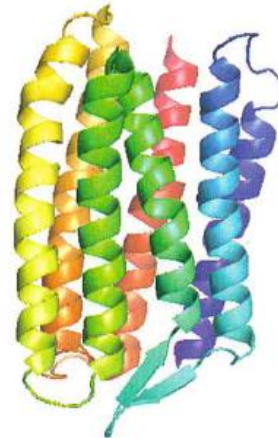
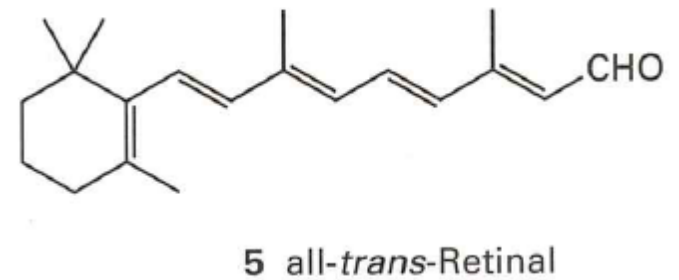
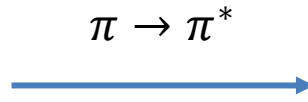
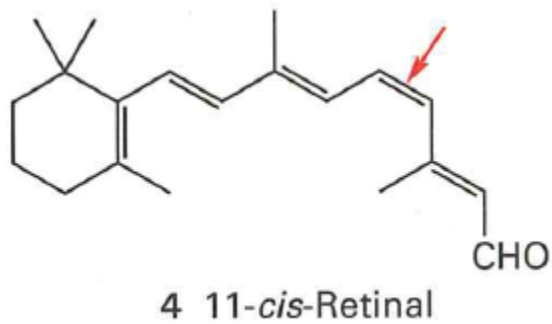
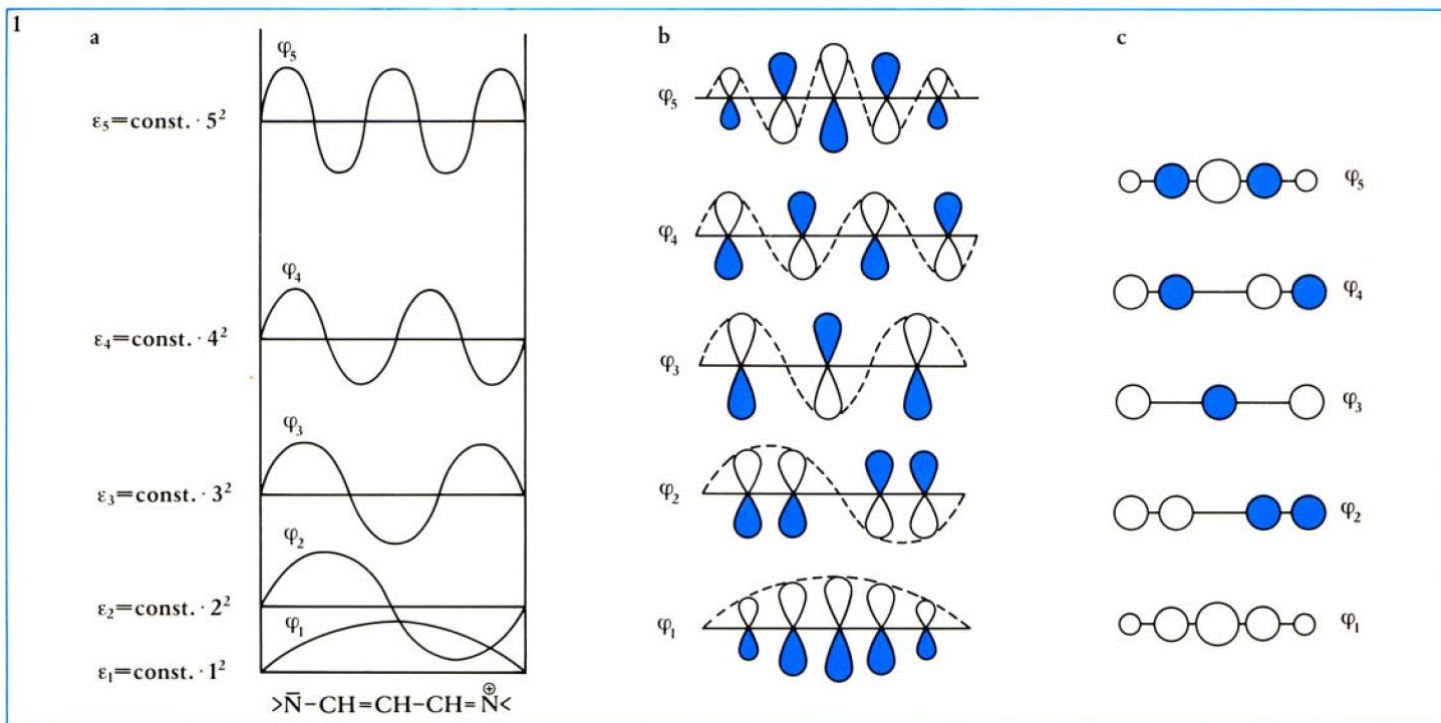


Abb. 13-19 Die Struktur des Rhodopsinmoleküls, das aus einem Opsinprotein besteht, an das ein Molekül 11-*cis*-Retinal gebunden und in den von spiralförmigen Bereichen umgebenen Raum eingebettet ist. Nur das Protein ist gezeigt.

Elektronenübergänge in Polyenen



$$\Delta E = \frac{h^2}{8mL^2} (4^2 - 3^2)$$

$$\lambda_{\text{HOMO-LUMO, calc}} = 300 \text{ nm}$$

$$\lambda_{\text{HOMO-LUMO, exp}} = 313 \text{ nm}$$

Elektronenübergänge in Polyenen

